

学校编码: 10384

分类号____密级____

学号: 19820060153169

UDC____

厦 门 大 学

博 士 学 位 论 文

三种典型布朗马达的定向输运

与非平衡态热力学分析

The Directed Transport and Nonequilibrium

Thermodynamic Analysis of Three Typical Brownian motors

高 天 附

指导教师姓名: 陈 金 灿 教授

专 业 名 称: 理 论 物 理

论文提交日期: 2009 年 5 月

论文答辩时间: 2009 年 6 月

学位授予日期: 2009 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2009 年 6 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（ ） 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

（ ） 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

摘 要

在传统的热力学中，一旦知道系统的始态和终态能量以及连接两态的路径，便可确定系统对外作的功。事实上，两态的能量及系统与环境在路径上的交换热均有 $k_B T$ 涨落，只是在玻耳兹曼统计中，这个量级的涨落被忽略了。如果系统很小，这样的涨落则不能被忽略。这类微观系统的统计热力学问题是纳米科学当前所面临的研究障碍。分子马达正是这样的微观系统，可为物理学家解决该问题提供一个理想的研究平台。

近年来噪声诱导定向输运的现象已经引起人们的广泛兴趣。这种现象已经被普遍地应用在物理、化学以及生物上。理论和实验上研究的都比较集中的一个系统是动蛋白马达或者力蛋白马达的定向运动。这类马达蛋白主要负责细胞器官的输送，它们的运动是随机的但平均来说是定向运动，并且可以用布朗棘轮来构建这样的模型。于是布朗马达的概念便被用来解释噪声诱导定向输运。

基于以上原因，本论文围绕几种典型的布朗马达模型进行讨论，研究了马达的定向输运行为。同时应用非平衡态热力学理论探索受不可逆因素影响的热驱动布朗马达系统的各种最优性能参量对马达性能的影响。主要研究内容如下：

介绍了布朗运动的动力学理论，对定向输运系统(热力学棘齿)和布朗马达作一整体概述。详细介绍了分子马达的研究历史、分类、模型的构建以及理论框架，同时还对现有模型中马达模型研究的不足作了探讨和分析，期望对今后的研究有所启示。

研究了由两个相同周期不对称势垒构成的两态闪烁棘齿模型中布朗粒子的定向输运。采用幂级数展开的方法得到了几率流的解析式，给出几率流随外参数变化的特性曲线。详细地讨论了不对称参数，势垒高度以及两态间的跃迁率等因素对几率流的影响。发现几率流不但会受到不对称参数和势垒高度的影响，而且两态间的跃迁率同样会影响到几率流。当两态间的跃迁率不等时，还发现势垒高度不仅会改变几率流的大小而且还会改变几率流的方向。

基于一个更为普遍的布朗马达模型，解析求解了热驱动布朗马达的昂色格系数和普适效率。发现模型的昂色格系数满足倒易关系，由粒子运动产生的动能变化部分不会影响昂色格系数。仅当系统的热漏部分可以忽略时，昂色格系数行列式等于零。此外，详细地讨论了表征模型的各个参数对热布朗马达效率的影响。给出普适

效率随系统参量变化的特性曲线，计算了效率的最大值和相应的优化参数。得到的计算结果更具有普遍意义，它们可以用来分析布朗马达在三个有趣条件下的性能特性：没有热漏情况，平均速度等于零的情况和线性响应区附近的情况。

在上述基础上，建立了一个等效的循环系统，运用非平衡态热力学理论计算了系统的昂色格系数和最大输出功率时的效率。发现模型的昂色格系数满足倒易关系，对于现实系统的不可逆因素同样会影响模型的昂色格系数。仅当热漏和粒子动能改变部分可以忽略时，昂色格系数行列式等于零。同时还发现在非平衡态热力学框架下，对于不可逆热布朗马达的输出功率和效率可以表述成和不可逆卡诺热机相同的形式，因此所得的结果更具有普遍意义。此外这些结论还可以用来分析一类热驱动布朗马达的性能特性。

基于理论上可以计算且实验上可以操作的双阱棘齿势，研究了延迟时间，粒子数，势垒的不对称参量对延迟反馈棘轮性能的影响。计算了布朗粒子的质心速度，平均有效扩散系数以及 Pe 数。详细地解释了这些参数不仅会受到延迟时间和粒子数的影响，而且还会受到双阱棘齿势的不对称参数的影响。很有趣地发现通过改变系统的粒子数可以获得定向流的反转。期望能够在某些物理和生物系统中观测到这些结果，因为本模型采用的是更为实际的并且可以在实验上实现的双阱棘齿势垒。

本论文所得的结果可作为进一步深入研究上述三种典型布朗马达的理论基础，也可为相关纳米机器的优化设计提供理论参考。

关键词：布朗马达；定向输运；非平衡态热力学

Abstract

Once we know the initial and final energies of the system and the path between them, the work output of the system can be determined by classical thermodynamics. In fact, there exists the quantity of fluctuations with $k_B T$ dominate in the energies of the two states and the exchange heat between the system and the environment. In the Boltzmann statistic the quantity of fluctuations is usually negligible. However, the fluctuations aren't negligible as the systems are very small. The statistical thermodynamic issues appearing in microscopic systems are becoming the holdback which has to be faced with in the nano science. Molecular motors are just such microscopic systems which may serve as the basis for physicists to solve the problems.

The phenomenon of noise induced directed transport has attracted much interest in recent years. It has widespread applications in physics, chemistry and biology. One particular system which has been intensively studied both theoretically and experimentally is the motion of motor proteins like kinesins or dyneins. These motor proteins are responsible for the transport of cell organelles along the cytoskeleton. They move randomly but directly on average and have been modeled by Brownian ratchets, and consequently, the concept of Brownian motors has been used to illuminate the directed, noise-induced transport.

Based on the above reasons, this thesis is focused on the discussion of several typical Brownian models, and then the directed transports of Brownian motors are investigated. The performance parameters of the thermally driven Brownian motors systems under the influence of the irreversibilities are searched by using nonequilibrium thermodynamics. The main research contents are organized as follows:

The brief introduction of the dynamics theory of the Brownian motion and thermodynamic ratchets and Brownian motors are given. The research histories, classification, construction of the model and theory frame of the molecular motors are presented in detail. The insufficiency of the Brownian ratchet model in existence is explored and analyzed. It is expected that this discussion can give some inspire for future research.

The transport of Brownian particles in two-state flashing ratchets composed of two asymmetric potentials with the same period is investigated. The analytic expression of a probability current is derived by using the power series expansion method and used to generate the curve characteristics of the current varying with other parameters. The effects of the asymmetric parameters and heights of two potentials and the transition rates between two states on the probability current are discussed in detail. It is found that the current is affected by not only the asymmetric parameters and heights of two potentials but also the transition rates between two states. It is also found that the heights of two potentials may change the magnitude as well as the direction of the current when the transition rates between two states are not the same.

Based on a general model of Brownian motors, the Onsager coefficients and generalized efficiency of a thermal Brownian motor are calculated analytically. It is found that the Onsager reciprocity relation holds and the Onsager coefficients are not affected by the kinetic energy change due to the particle's motion. Only when the heat leak in the system is negligible, can the determinant of the Onsager matrix vanish. Moreover, the influence of the main parameters characterizing the model on the generalized efficiency of the Brownian motor is discussed in detail. The characteristic curves of the generalized efficiency varying with these parameters are presented. The maximum generalized efficiency and the corresponding optimum parameters are determined. The results obtained here are of general significance. They are used to analyze the performance characteristics of the Brownian motors operating in the three interesting cases with the zero heat leak, zero average drift velocity or linear response relation.

An equivalent cycle system is established based on the above discussion and the Onsager coefficients and efficiency at the maximum power output of the system are analytically calculated from nonequilibrium thermodynamics. It is found that the Onsager reciprocity relation holds and the Onsager coefficients are affected by the main irreversibilities existing in practical systems. Only when the heat leak and the kinetic energy change of the particle in the system are negligible, can the determinant of the Onsager matrix vanish. It is also found that in the frame of nonequilibrium thermodynamics, the power output and efficiency of an irreversible Brownian motor can be expressed to be the same form as those of an irreversible Carnot heat engine, so the results obtained here are of general significance. Moreover, these results can be used to analyze the performance characteristics of a class of thermally driven Brownian motors.

On the basis of the double-well potential which can be calculated theoretically and implemented experimentally, the influence of the time delay, number of particles and asymmetric parameter of the potential on the performance of a delayed feedback ratchet is investigated. The center-of-mass velocity of Brownian particles, the average effective diffusion coefficient and Pe number are calculated. It is expounded that the parameters are affected by not only the time delay and number of particles but also the asymmetric parameter of the double-well ratchet potential. It is very interesting to find that the current transport reversal may be obtained by varying the number of particles of the system. It is expected that the results obtained here may be observed in some physical and biological systems because the double-well ratchet potential is realizable experimentally.

The results obtained in the thesis may provide some theoretical bases for the deep investigation on the three classes of typical Brownian motors mentioned above as well as some references for the optimal design of some relevant nano machines.

Keywords: Brownian motor; directed transport; nonequilibrium thermodynamics

厦门大学博硕士论文摘要库

目 录

引 言	1
第一章 布朗运动的动力学理论	5
§ 1.1 布朗运动理论	5
§ 1.2 随机力与朗之万方程	10
§ 1.3 福克 - 普朗克方程及其解	13
§ 1.4 昂色格倒易关系	16
参考文献	17
第二章 热力学棘齿与布朗马达概述	19
§ 2.1 分子马达简介	19
§ 2.2 布朗马达研究的历史回顾	20
§ 2.3 费曼棘齿	21
§ 2.4 布朗分子马达理论模型	24
§ 2.5 周期势场中的布朗运动	25
§ 2.6 布朗马达的普适效率理论	28
参考文献	31
第三章 布朗马达在两态闪烁棘齿势中的几率流特性	36
§ 3.1 两态闪烁棘齿模型	36
§ 3.2 几率密度和几率流	38
§ 3.3 几率流随参数变化的特性曲线	41
§ 3.4 本章小结	49
参考文献	49
第四章 热驱动布朗马达的昂色格倒易关系和普适效率	52
§ 4.1 热驱动布朗马达	52
§ 4.2 昂色格倒易关系	54
§ 4.3 普适效率	56
§ 4.4 讨论	61

§ 4.5 本章小节	65
参考文献	65
第五章 不可逆热驱动布朗马达性能的非平衡态热力学分析	68
§ 5.1 不可逆热驱动布朗马达模型	68
§ 5.2 昂色格系数	70
§ 5.3 最大输出功率时的效率	73
§ 5.4 本章小节	75
参考文献	75
第六章 双阱棘齿势中布朗马达定向输运的反馈控制	78
§ 6.1 延迟反馈棘轮	79
§ 6.2 朗之万方程的数值计算	81
§ 6.3 结果和讨论	82
§ 6.4 本章小节	86
参考文献	86
第七章 结束语	90
§ 7.1 总结	90
§ 7.2 问题与展望	91

附 录 攻读博士学位期间发表的论文及奖励

致 谢

CONTENTS

Introduction	1
Chapter 1 Dynamics theory of Brownian motion	5
§ 1.1 Theory of Brownian motion	5
§ 1.2 Stochastic force and Langevin equation	10
§ 1.3 Fokker-Planck equation and its solutions	13
§ 1.4 Onsager reciprocity relation	16
References	17
Chapter 2 Thermodynamic ratchets and Brownian motors	19
§ 2.1 Brief introduction of molecular motors	19
§ 2.2 History review of Brownian motors	20
§ 2.3 Feynman ratchets	21
§ 2.4 Theoretical model of Brownian motors	24
§ 2.5 Brownian motion in periodic potentials	25
§ 2.6 Theory of generalized efficiency of Brownian motors	28
References	31
Chapter 3 The current characteristics of two-state flashing ratchets composed of two asymmetric potentials	36
§ 3.1 A two-state flashing ratchet composed of two asymmetric potentials	36
§ 3.2 The probability density and current	38
§ 3.3 The characteristic curves of the probability current versus other parameters	41
§ 3.4 Conclusions	49
References	49
Chapter 4 The Onsager reciprocity relation and generalized efficiency of a thermal Brownian motor	52
§ 4.1 A thermal Brownian motor	52
§ 4.2 The Onsager reciprocity relation	54
§ 4.3 The generalized efficiency	56
§ 4.4 Discussion	61

§ 4.5 Conclusions	65
References	65
Chapter 5 Nonequilibrium thermodynamic analysis on the performance of an irreversible thermally driven Brownian motor	68
§ 5.1 An irreversible thermally driven Brownian motor	68
§ 5.2 The Onsager coefficients	70
§ 5.3 The efficiency at maximum power output	73
§ 5.4 Conclusions	75
References	75
Chapter 6 The current transport characteristics of a delayed feedback ratchet in a double-well potential	78
§ 6.1 A delayed feedback ratchet	79
§ 6.2 Mathematical computation for Langevin equation	81
§ 6.3 Results and discussion	82
§ 6.4 Conclusions	86
References	86
Chapter 7 Summary and expectation	90
§ 7.1 Summary	90
§ 7.2 Problems and expectation	91
Appendix: List of Publications and Encouragement	
Acknowledgments	

引 言

自从工业革命以来,对发展新技术来说热力学已经成为一门指导法则。同时21世纪又是纳米科技的世纪,人们可以构造和操纵所需要的纳米尺度上的机器。高集成、智能化纳米器件的开发可以推动信息技术、生物技术、新材料技术、能源技术及环境技术等的高速发展。纳米技术是目前国际科技竞争的前沿,也是对未来社会发展、经济振兴、国力增强最有影响力的战略研究领域。人工纳米机器的构建与应用是此前沿领域国际上最具有挑战性的热点课题之一。

然而在实际系统中我们不得不克服出现的各种问题,例如当系统的尺度接近于分子大小的时候,热涨落开始扮演非常有“意义”的角色。不幸的是,对于肉眼可观测的系统来说热涨落的影响在最初的理论发展中经常被忽略,在处理涨落占主导的情况时标准的热力学理论通常是无能为力的。人们经常采用的是随机方法例如福克-普朗克(Fokker-Planck)方程或者朗之万(Langevin)方程。尽管这些方法已经成功地应用了很多年,但是热力学以及随机方法间的关系并没有很好地建立起来。分子马达正是这样一种微观系统,它能够为物理学家解决该问题提供一个理想的研究平台。

让纳米机器在很强的热涨落环境中运行是一件相当困难的事情。纳米机器必须能够很和谐地工作或者可以与热涨落进行合作。为了设计这样的机器,并且考虑很强的热涨落的影响,人们需要去了解非线性系统的时空动力学与合作行为。对于非线性系统中的输运可以体现在许多不同的方面,表现为不同的具体行为,例如扩散、漂移、热传导等宏观现象。在诸多的输运行为中,有一种现象是近年来受到物理、生物等不同领域密切关注的,那就是物质、能量流的定向输运问题。这里更让人们感兴趣的是当作用于系统上的外力总的效果为零(甚至没有外力)时定向输运的可能性及效率。对于这种情况,系统要产生定向运动,就需要打破内部或外部的某些对称性,从而将涨落或非定向驱动的能量转化为定向运动的能量(做功)。

在生物系统中,例如马达蛋白就是类似的在很大的热涨落环境下工作的分子机器。关于分子马达问题的研究,最早可追溯到热力学中有关第二类永动机(单源热机)问题的争论。近年来在生物学、物理实验等许多方面定向输运研究成为新的热点。生物分子马达是将化学能转化为力学能的生物大分子,它们广泛存在于细胞内,且常处在纳米尺度,因此也被称为纳米机器。生物分子马达能主动从环境中俘获“能

量分子” ATP (adenosine triphosphate, 三磷酸腺苷), 借助热涨落来消耗ATP水解所释放出的化学能, 进而改变自己的构象。一旦与轨道结合, 马达通过构象变换产生与轨道间的相对运动, 因此它们具备“自动性”(motility)。扩散系统自身不可能产生定向的输运过程。定向运动的出现需要破坏细致平衡以及空间反演对称性。由于受到费曼棘轮和棘爪装置的启发, 这种定向运动的现象被命名为棘轮效应。然而, 当系统的环境由热涨落决定时, 布朗马达的输运就会受到噪声的控制和影响。相关的分子机器, 例如布朗马达, 泵以及离子通道便从基本的马达概念中衍生出来。

生物分子马达按运动形式可分为线动和转动两大类。线动马达常常与特定轨道结合在一起, 利用ATP水解所释放出的化学能产生与轨道的相对运动, 其作用机制与人造发动机类似。这类马达主要有肌球蛋白(myosin)、驱动蛋白(kinesin)和动力蛋白(dynein)等; 转动马达则类似于人造电机, 也由“转子”和“定子”两部分组成, 这类马达包括鞭毛马达(flagellar)和ATP合成酶(ATP synthase)等, 它们的运动往往是可逆的。

生物分子机器是上亿年进化的产物, 尺寸大多在几个纳米到几百个纳米之间, 其结构、动态与功能的关系为人工纳米机器的设计和制备提供了绝佳的范例和素材。人们可以直接利用天然蛋白质酶为材料构建能够实现能量转换的分子机器以满足实际需求。通过研究各种纳米生物机器的物理化学过程, 尤其是纳米尺度的物理、化学作用的特殊性(如热涨落的重要性等), 人们可以探索纳米生物机器的普遍运动规律。这些新规律可以指导人们找出优化设计原则, 进而引导人工纳米机器的构建与应用, 其作用不亚于卡诺(Carnot)热机模型对工业革命的影响。

众所周知, 卡诺热机在现代热力学理论发展时期同样具有里程碑的地位, 因为它是一种非常理想的热机模型。类似, 当系统完全处于热涨落的环境中时布朗马达也同样成为最基本的工作模型。特别地, 对于自恰的热机模型, 例如 Feynman-Smoluchowski (FS)和 Büttiker-Landauer (BL)马达, 不像其他马达那样, 并不需要和时间关联的外涨落。这些马达的运动完全取决于热涨落的影响。当马达的尺度变化到肉眼可见的尺度时他们的“自动性”(motility)将会消失。

在过去的20年间, 人们研究了各种类型布朗马达, 包括动力学, 随机能量, 效率以及连续的(Langevin equation)和不连续的(Master equation)态空间。因为生物马达主要处在远离平衡态的区域运动, 热力学的线性响应理论不再适合描述这样的系统。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库